第 2 回荷電粒子ビーム基礎講座

静電磁界の解析法

Electron Beam Solutions Tsuno (EOST) 津野勝重
Tsuno6@hotmail.com

1. はじめに

荷電粒子ビーム機器を設計するに当たっては、荷電粒子に対してレンズや偏向器、分析器など荷電粒子ビームと相互作用を行う装置についてそれらが作る電場や磁場を計算し、その場の中で電子の軌道を求め、収差や倍率、偏向量、エネルギー分散などを計算し、それらが最も望ましい値となる装置の形を求めることが普通になってきた。シミュレーションを行って荷電粒子光学系の設計を行う手法は 1970 年代の終わりに二次元軸対称なレンズについて行われるようになり、やがてコンピューターの充実と共に 1990 年代から三次元の分析装置などにも広がりを見せてきた。

このような Computer Aided Design の手法が発展したことで、荷電粒子光学系の設計は数少ない専門家の手を離れ、誰でもができるものになったと思われたが、実態は今日でも電子レンズの設計が出来る人は社内に一人しかおらず、その人の退職を控えて困っていると言った話を耳にすることがある。このことは、誤ったソフトウェアの導入の場合が一つ、担当者全員がが一応対応出来るものの、専門的な対応が出来ず、難しい設計が出来ない状態に止まっている場合が第二である。荷電粒子光学系の設計はソフトを買えば出来るものではなく、基礎理論を理解し少なくとも数年に及ぶ練習が必要である。

2. どんなソフトウェアを選べばよいか

電磁場のソフトには大きく分けて次の 3 種類がある。

1. 高周波電磁場に対応したソフト。主に電子回路の設計時に回路の電流による磁場の発生とその周辺回路への影響などについて計算することが目的となっている。
2. 交流磁場も計算でき、渦電流の計算や、コイルの作る静磁場や永久磁石の作る力の計算なども出来る。モーターや永久磁石の計算に主眼を置いている。
3. 加速器の研究者がスピンアウトして作ったソフトで、電場・磁場中の電子やイオンの運動に主眼が置かれている。

我々、荷電粒子光学系の設計者が購入して役に立つ電磁場ソフトは 3 だけである。交流磁場が計算できるかどうかなどに惑わされてはならない。また、日本人の書いたソフトだからと言う理由で選択するのもお勧めではない。日本でも加速器の研究者は独自のソフトを開発しており、彼らの設計した加速器は彼らの製作したソフトで作られている。彼らは国の研究者なのでお願いすれば無償でソフトを供給してくれるが、これはお勧めではない。

商品として販売され、多くの人が利用した結果、エラー対応が充実しているソフトこそが使いやすいソフトだからである。この意味で市販ソフトは全て外国製となり、その種類も少ない。

日本では加速器研究者でなくとも独自の電子光学系に使える電磁場ソフトを開発しておられる人たちはいる。例えば、名城大学の村田さん[i]は精力的にこの種の開発を進めておられた。132 委員会ではかつて、名城大学と交渉して、132 委員会の会員が使えるように整備出来ないか交渉したことがあったが、まとまらなかった。

3. 電子光学系の解析に適したソフトとその説明

価格帯	ソフト名	開発者	ソフトウェア	特徴
無償	M1, E1	Munro	2D-FEM	(新規入手不可)
	AMAG	Lencova	2D-FEM	(新規入手不可)
15 万円以下	SIMION	Scientific Instrument Services Inc.	3D-FDM	電場のアナライザ、イオン光学の必需ソフト
70 万円	CPO	Read	BEM	境界要素法
100~150 万円	XENOS	Field Precision	2D, 3D-FEM	廉価版 3D 磁場、電場、永久磁石。
200 万円	EOD	Lencova	2D-FEM (3D)	オールマイティ電子光学(欧州)
300 万円以上	Lorentz, Opera	Integrated E Soft. Vector Field	3D-FEM	軌道計算の出来る 3D 電磁場。
1000 万円以上	MEBS ソフト	MEBS (Munro)	2D-FEM, 3D-FDM	電子光学(日米)目的別ソフトの集合。

3.1. 初期の Munro/Lencova ソフト

Munro ソフトが初めて紹介されたのは 1970 年である。それから約 10 年、このソフトは色々なルートで世界中に広まった。この頃、有限要素法ソフト Nastran が機械系の分野に使われ、その応用として熱、電磁気など各方面に広がりだしていた。Munro ソフトの効用は、それまで神様と呼ばれた特別の人にしか出来なかった電子レンズの設計を普通の人にも開放した。その意味で Munro の電子光学に果たした役割は巨大である。

Munro/Lencova ソフトの原理は付録に詳しく述べておいた。有限要素法の原理は多くの本に解説されているが、実際に使っているソフトと違った方法であることが多く、私の場合は実際には役に立たなかった。付録に示した有限要素法の原理は、ソフトウェアの文を直

接解読したもので、符号も同じである。Munro/Lencova ソフトのこの部分は今の有料ソフトでも同じと思われるので、その中身を理解するのに役に立つと思う。

Lencova ソフトは Munro ソフトを見ながら開発され、いくつかの改良がなされた。一つは磁気飽和の取り扱いである。Munro ソフトは指定したアンペアターンを一つだけ計算する。磁気飽和は繰り返し計算で達成されるが、最初は高い透磁率が用いられ、大きな磁場を発生し、結果として対応する透磁率は非常に低い値となる。第 2 回目はその低い透磁率を使うので発生する磁場が極端に低くなり、3 回目はその低い磁場に対する高い透磁率で再び高い磁場になると言うように結果が大きく振動する。Lencova ソフトでは複数のアンペアターンを連続して計算でき、1 回目に計算した各場所の透磁率を二回目で使うことが出来るので、磁気飽和のない低いアンペアターンから順次高いアンペアターンに上げていくという計算方法をとることが出来る。その場合は振動をすることなく素早く収束させることが出来る。また、アンペアターンを変えた軸上磁場分布が求まっているので、フォーカス条件を求める時に便利である。

もう一つの大きな進歩は、ICCCG 法と言う巨大でほとんどが零の値を持つマトリックスの解法を採用したことである。この原理説明も付録に記載してある。両ソフトで採用している X, Y 両メッシュが同じ数だけ上から下まで、あるいは左から右端まで繋がっているようなマトリックスの場合にメモリー容量と計算時間の両方をいずれも 1/100 位に出来る計算法である。この ICCG 法の採用によって、1980 年代に、それまでメインフレームと呼ばれた大型計算機でしか計算できなかった有限要素法ソフトがミニコンと言う小規模の計算機で可能になった。

Lencova ソフトに途中で追加された機能として、メッシュサイズをギャップ中心から端までスムーズに大きくする自動化ソフトがある。これは最初ケンブリッジ大学で、Munro ソフトをグラフィックスの可能なミニコンソフトに移植する Cielas I というプロジェクトが 1980 年代にあり、そこで Hill(のち Zeiss で He イオン顕微鏡を開発)が作った手法である。

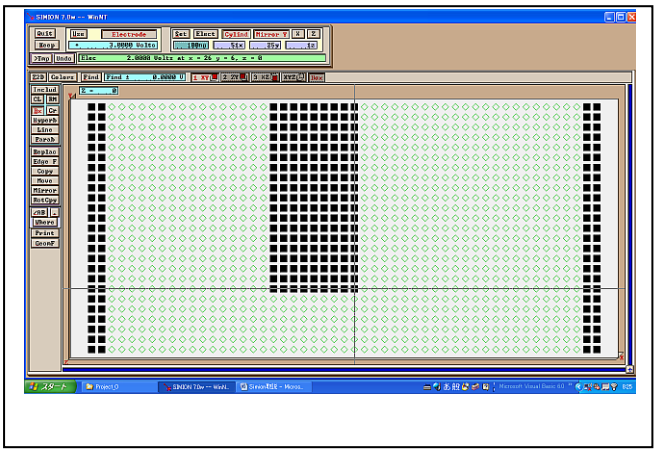
これらの 3 つの機能のうち、Munro がその後の有償のソフトに乗せたのは ICCG 法だけで、磁気飽和の段階的解法とメッシュの幅の自動調節機能は入っていない。しかし、Munro はその後二次の有限要素法プログラムを開発した。これは、曲面を自由に取り扱うことが出来るため、特に電極の計算に便利なことと、計算結果がメッシュの作り方やその数に依存しないという便利さがある。所が、Lencova ソフトでは、あくまでも一次の有限要素法で十分であるとして今でも二次を取り入れていないため、電場計算に不便がある。

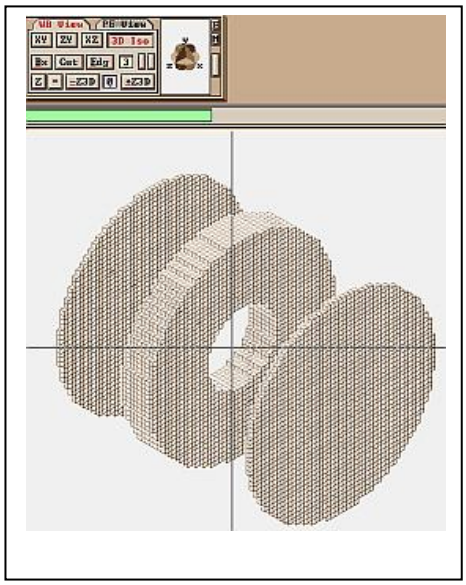
3.2. Simion

Simion は、荷電粒子光学ソフトの中では世界中で最も普及したソフトと言える。このソフトはもともと大学や公的研究機関に対しては無償で配布されていたソフトである。日本では取扱説明書を印刷したりなどして大学にも有償で販売する代理店がある。ただ、購入し

ても現在手に入れることのできる最も安いソフトであり、最も普及していると言う点で色々便利なソフトと言うことが出来る。

Simion は FDM(Finite Difference Method 有限差分法)を使ったソフトである。形状入力法がウィンドウズの画面を使って行わなければならないが、古臭い画面のため、時間がかかる。式を使った入力法もあり、その方が便利で早いと言う人もいる。





上の図のような入力方法は必ずしも便利ではないが、その後に表示される右のような 3D の図が出てくればある程度めんどうも報われる。このように、Simion は、電場だけを扱う場合にはこれだけで設計に使うこともできるが、磁場の解析には、FDM では不十分である。具体的な形状設計には FEM(有限要素法)を利用する方が安心である。電場計算だけであれば BEM(境界要素法)ソフトを使う方が FDM でやるより良い。ただ、半球アナライザなどの論文の多くは Simion ソフトを使って解析されているので、電場が主体で使う場合は、入力方法を工夫して使いこなしていくのも良い。

3.3. CPO

CPO ソフトの使用経験はないので Web サイトだけから判断せざるを得ないが、このソフトを取り上げた理由は、作者の Read は CPO コンファレンスに良く出席しておられる人であること、ソフトが BEM(Boundary Element Method)で作られていることによる。沢山の例題を示しているが、200 個以上の穴を持つメッシュの計算が出来ることなども特徴である。
正確な電場中の電子軌道を求めたい人向きのソフトと言えるかも知れない。

3.4. XENOS

XENOS は、3D の有限要素法(FEM)プログラムである。磁場型のアナライザの解析には FEM ソフトが必須である。このソフトは安かろう悪かろうの点がなくはないが、磁場の 3D-FEM では手ごろな価格のソフトとしてお勧めである。私はもっぱらこのソフトを使っている。
筆者は以前オメガフィルタの設計を FDM で行って苦い経験をしたことがある。FDM ではリターンヨークもコイルも計算に入れることが出来ない。いくら高精度の軌道計算を行っ

ても実際の装置と同じ形の入力が出来ないソフトでは危険がある。とくに、磁極面が傾斜した電磁石を用いる場合には、電磁石全体を考慮した計算が必要である。

XENOS が軌道計算用の場の解析ソフトとして優れている点は、いったん全体で計算した後、光軸を含む 1/3 程度の直径の領域を切り出し、その領域でメッシュを細かくして再計算出来ることである。この時、一番外側の境界のポテンシャルに最初に全体を計算した時のポテンシャルが使用できる。電子の軌道が通るのはたいていの場合半径 1mm 以内の領域なので、計算領域は最終的には半径数 mm 以内に限定して良いので、このテクニックを用いて数回繰り返し計算を行えば、かなり細かいメッシュ間隔で場の計算が出来る。

計算速度に関しても、数年前まで使用していた 32 ビット版のコンピューターに比べ、64 ビット版では CPU が二個並列に用意されている場合が多いので、この二つを並列計算で同時に使うモードで計算させれば、従来 20 時間程度かかっていた計算を、メッシュ数を 1.5 倍程度に多くした後でも、2 時間くらいで終わらせることが出来るようになった。形状入力でも、CAD データーからの入力は 2D 軸対称形の場合には出来る。XENOS では、計算結果のリストと共に計算の途中状況を示すテキストデーターが生成され、エラーでストップした場合は、どこにどんな不具合があったのかが記載されている。このため、すぐに対応が出来ることが多い。適切な価格のソフトは販売実績が多くなるので、ソフトに対する不具合の通知も多くなり、従ってエラー対策が充実することになる。

3.5. EOD

EOD は、Lencova ソフトのウィンドウズ版である。Lencova は、Brno の理化学機器研究所の中でウィンドウズソフトに詳しい人を見つけることが出来、自分がデルフト時代に作ったソフトをウィンドウズ版に切り替えることに成功した。その中身はデルフト大学からの注文で色々な機能を含んでおり、全体で一つのまとまったソフトでありながら全機能が一つのソフトに含まれている。この点が Munro の最近のソフトウェアと大きく異なる点で、Munro ソフトは設計する装置が異なると別のソフトを購入しなければならないが、Lencova ソフトは一度買えば色々な用途に使える点で安心である。ただ、若干の機能はオプションになっている。このため、Munro ソフトに比べて 1/10 程度の値段で仕事が出来る。

ただし、そのウィンドウズ化ソフトは、荷電粒子光学に詳しくない人が作っているせいか、前の MS-DOS ソフトに比べて使いにくい点も多い。Munro ソフトがウィンドウズには素人だが全員が電子光学の専門家でやっていることを誇っているのと違う道を歩んでいる。

Lencova ソフトでは、場の計算は 2D-FEM 一本である。Chu, Munro(1984)による、フーリエ変換法を使ったデフレクターやスディグメーターなどの対称性を有する非軸対称系の計算法を適用して、電子顕微鏡などで使われる偏向系、非点補正系、多極子収差補正子、Wien Filter のような対称性のあるアナライザの計算ができる。純粋な 3D 問題は対処できない。ただ、物質中の電子の運動なども扱えるオプションもあると言うことである。

なんでも出来る万能ソフトが手軽な価格で手に入るが、使ってみるといくつもの壁にぶつかる。一つは電極の曲面の入力が困難である。第二は、計算精度にうるさく、少しでも入力ミスがあると計算が始まらない。ミスがあると計算が始まらないのは正しいが、それにはどこにミスがあるかをソフトが指摘してくれてのことである。黙って計算がいつの間にか終了していることが繰り返されると不便である。エラー処理のコメントがあるかないかがどれだけソフトの利用にとって大切かと言うことは XENOS ソフトと EOD ソフトを比べるとはっきりと認識できる。

この点が EOD ソフトの今後の課題である。もし、エラー対策のコメントを出すのが大変であれば、エラーがあってもとにかくプログラムを走らせて、結果をアウトプットさせるのも一つの方法である。エラーによっておかしな結果が出れば、それを見た利用者はエラーに気付きやすい。ストップして終わりの場合は、エラーを発見することが出来ない。この点、Munro の 2 次の FEM では、メッシュ作りが複雑になってエラーが出やすくなったのであるが、エラーがあってもメッシュの図を書いてくれるため、おかしなメッシュが表示されエラーの場所の発見に役立っている。

3.6. LORENTZ

これに関しても筆者は使用経験がないので詳しいことは分からないが、事情が許せば使ってみたいと日ごろから思っているソフトである。

3.7. Munro ウィンドウズソフト

Munro ソフトは、二次元(2D)軸対称系は FEM、三次元系(3D)は、FDM を使って計算する。ただし、偏向系とスティグメータは、2D-FEM のフーリエ変換から求められる。これらで計算された場を使って､色々な軌道計算のソフトが用意されそれぞれ 300~500 万円程度する。組み合わせレンズ計算(OPTICS), 電子銃、多極子、ミラー、カーブした光学系、ベルシェ効果など沢山ある。いろいろの設計をやろうとすると次々ソフトを入手しなければならない不便さがある。最大の欠点は、せっかく高精度な軌道計算ソフトを抱えていながら 3D の場計算は、FDM だと言うことである。

もう一つは、収差計算ソフトが高度になり過ぎたことが結果として不便な点が出ている。球面収差係数が X, Y 合わせて 8 個も出力され、色収差係数の符号が世間常識と異なり、マイナスで表示される。その上、焦点距離が出力されないなどである。

3.8. それではどうするか

フォーカスを自動調整した電子軌道と収差係数の計算が出来る市販ソフトは Munro ソフトか、Lencova ソフトを選ばなければならない。最近の新しい傾向は、エクセルや、数式処理ソフトを使って、自分で軌道計算と収差係数計算を行う人たちが現れてきたことである。場の計算ソフトはいろいろあるので、軸上磁場や電場分布をテキストデータでアウトプッ

トさせ、それを読み込んで、数式処理ソフトで軌道計算と収差計算行わせれば後のグラフ処理などのプログラムは作る必要がなく、軌道と収差をグラフや表として出力することが出来る。ただ、私自身はそれを試みていないので、詳しい話は出来ない。

4. 例題

収差補正の普及によって電子レンズ計算の時代は終わったように思われたが、それはひとり高分解能 TEM/STEM のレンズだけの話であって、その他のレンズについては依然として全貌が明らかでない。高分解能 TEM/STEM 用レンズの場合には、磁気飽和による磁場分布のすそ野の広がりを球面収差係数 Cs 低減に利用するなどのテクニックが用いられた。色収差 Cc については磁場分布の半値幅を出来るだけ細くすることが求められたので、両者のバランスを考慮して最適の組み合わせで設計することが求められた。

一方、電子レンズの乗っているベースは鉄芯電磁石であることから、鉄芯電磁石設計のいろはを知っておくことも重要である。ことに、ほとんどすべての強磁場発生用電磁石が鉄芯を使わない超電導磁石に移行した現在、鉄芯電磁石設計のためのガイドラインとなる適切な参考書がないと言うことが、強磁場を発生させながら未だに超電導磁石に移行しない高性能電子レンズの設計にとっては大きな障害となっている。この点に関しては Orloff 編集の Charged Particle Optics[ii]に詳しく述べておいた。ここでは、電子レンズと電子線エネルギーアナライザの例を示し、どのような点が問題かについて述べる。

4.1. リターディングレンズまたはカソードレンズ

低加速電圧 SEM で使われているリターディングレンズと LEEM/PEEM で使われているカソードレンズは実は同じものである。一方は縮小系(減速レンズ系)、他方は拡大系(加速レンズ系)であるが、ビームの向きがさかさまに使われている。ただ、SEM では二次電子ビームは加速系として使われ、その検出法も問題とされるため、加速系についても関心がはらわれている。SEM のリターディングレンズについては、その特性が製品の性能を直接支配するため盛んに研究された。特に、加速された二次電子を検出器に導くための電子の軌道計算は重要であったものと思われる。一方、LEEM/PEEM のカソード対物レンズについての研究はあまり発表されていない。これは、LEEM/PEEM の性能に対する要求がまだカソードレンズのシミュレーションを極めなければならないほどに高まっていなかったためと思われ、今後の課題である。もうひとつ電子光学的には同じ課題の例として、磁場重畳型電子銃がある。

4.1.1. カソードレンズの電子軌道

次ページ右の図は試料面から 1eV と 10eV で出た電子ビームが対物レンズ内で 10kV まで加速される様子をシミュレーションしたものである。試料面は左端で、そこから 10mm 位の所に焦点面があり、右端が像面である。試料から 1eV で出たビームは各軌道の中心部の濃

い領域であり、10eV で出発したビームは外側の薄いビームである。焦点面では試料から電子が出発するときの角度の違いの他に、放出エネルギーの違いによっても分裂しており、内側が 1eV のビーム、外側が 10eV のビームである。10kV に加速された後でも像面でのビームエネルギーには 9eV の差が残っている。但し、残念ながら像面でのエネルギーを見ると、10,001V と 10,010V ではなく、例えば 9,986V と 9,995V といった具合で、必ずしも正確に 10kV ではない。これは計算精度の問題で、場の計算精度や、軌道計算の分割精度などを調整すると変化する。ただし、コンピューターのメモリーのサイズやソフトウェアが許容しているメモリーのサイズなどソフト、ハードの色々な制約があって、必ずしも調節可能なパラメータの値を変えただけではどうにもならないことが多い。

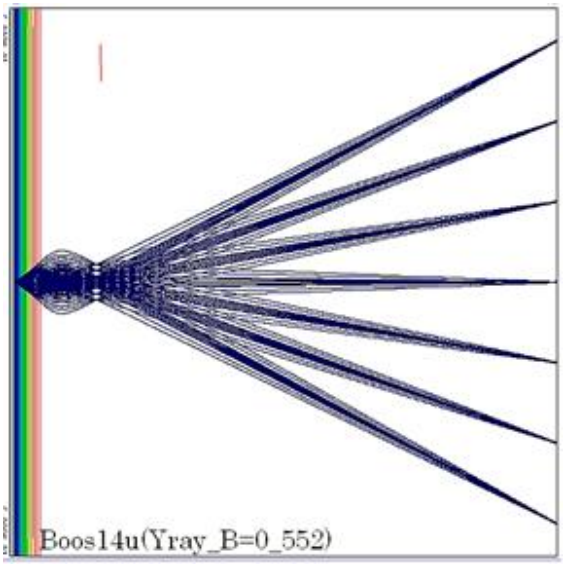
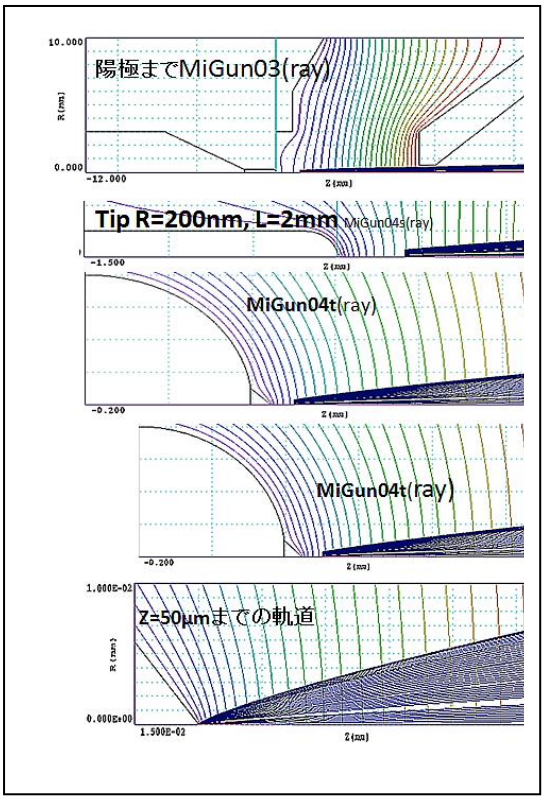


図. カソードレンスの電子軌道。



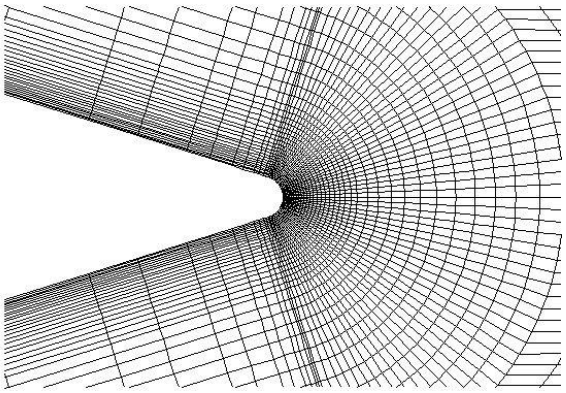
4.1.2. SEM 二次電子の軌道計算

SEM の二次電子が対物レンズの中で加速されながら対物レンズの上部まで持ち上げられ、検出器に到達する時に、対物レンズを通り抜けてその外で検出される場合をスルーザレンズ型検出器と呼び、対物レンズの中に穴のあいた検出器を置くタイプが、インレンズ検出器となる。インレンズ検出器の場合は、二次電子の広がり方があまり大きくならないように、全部の二次電子が丁度検出器にうまく入るような条件を見つけなければならない。これは、一次ビームで出来るだけ収差の小さい条件を探すのと同時に行わなければならないので、一次ビームの減速場でのレンズ作用と、二次ビームの加速場でのビームの広がりの両方を最適化すると言う難しい設計になる。

4.2. 電子銃軌道計算

電子銃の軌道計算でもっとも大きな問題は、カソード先端の大きさがミクロンであるのに

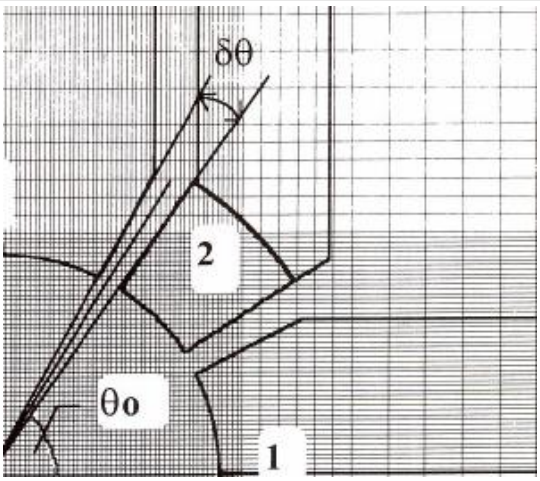
対して、アノードまでの距離あるいはアノードのサイズがセンチメートルの大きさであると言うサイズの問題である。この問題の解決法は二つあり、ひとつが前ページ右の図に示すように、最初陰極から陽極までの全体を含んだ系について荒っぽい計算を行い、次々に領域を狭めて、その都度メッシュの間隔を狭めていく方法である。場の計算とは逆の順で電子軌道の計算を行っていけば、必要な精度を確保した計算を行うことが出来る。



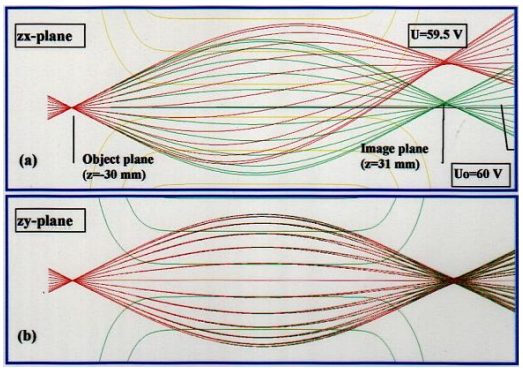
もうひとつの方法は左の図に示したような放射状メッシュを使う方法である。このメッシュでは、中心から周辺までメッシュサイズが何桁も変化するので、中心におかれた陰極先端から、周辺の陽極まで何桁もの差を一回で表現することが出来る。従って何回もの繰り返し計算の必要はないものの、新たなソフトウェアの購入が必要となる欠点がある。

4.3. 電場と磁場の三次元計算 – Wien フィルタの計算 --

3D の計算は Munro ソフトでは FDM を使って計算される。このとき、バウンダリーでポテンシャルが零になるか、連続するかの指定をすることが出来るので、ウィーンフィルタの場の計算を 1/4 の領域だけの計算で済ますことが出来る。Munro ソフトでは、計算結果のポテンシャルの図示やそれに引き続く軌道計算などにおいて、全体の領域の場の値が保存されるので全体について計算した場合と同じ計算や表示をさせることが出来る。これは大きなメリットで、対称性のある装置の場合、入力の簡便化、メモリーの節約にもなり大規模な計算を可能にしている。軌道計算の精度も高く、結果を理論と比較できるほどである。



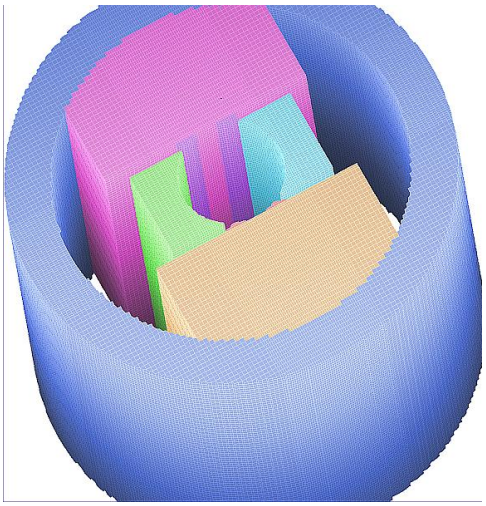
Munro ソフトの 1/4 の領域のメッシュ入力。



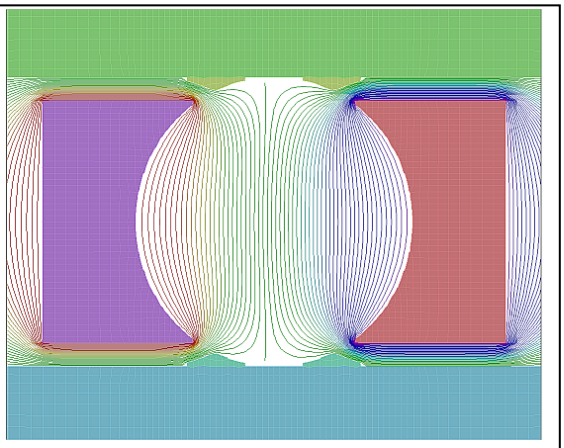
Munro ソフトでの軌道計算。

これに対し、Xenos では、対称性を考慮して、バウンダリー条件を入れて 1/4 の領域だけ

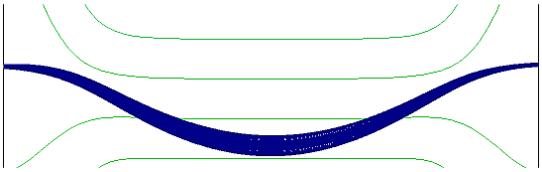
で計算しても正しい答えを得ることは出来るが、グラフ表示も 1/4 の領域しか出来ず、軌道計算も全領域について行えるわけではない。



Xenos ソフトによるメッシュ生成。



Xenos ソフトによる電場ポテンシャル。



Wien フィルタとしての軌道。

軌道計算の精度を高くするためには、メッシュ領域を次第に狭くするなど繰り返し計算を行って十分細かいメッシュで計算しないと軌道計算が乱れた結果を与える。

しかし、コイルやリターンヨークを入れた計算が出来るので、磁場を含む系の設計には FEM が欠かせない。また、自動メッシュ分割が必ずしも対称に行われないために、軌道が乱れる場合もある。これは実際にものを作った場合の機械加工精度の狂いの影響のようなものであり、実際の装置で起こる種々の不具合を考える上で参考になる場合もある。

---

[i] H. Murata, T.Ohye, H. Shimoyama, High accuracy calculation of magnetic field by improved 3-D boundary magnetic charge method, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A 519 (2004) 175-183.

[ii] K. Tsuno, Magnetic Lenses for electron microscopy, in Charged Particle Optics, ed. J. Orloff, CRC Press, (2008) 129-160.